

В.Л. ПОЛЯКОВ, доктор технічних наук

Інститут гідромеханіки НАН України

С.Ю. МАРТИНОВ, кандидат технічних наук

Національний університет водного господарства та природокористування,

м. Рівне

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИНАМІКИ НАКОПИЧЕННЯ СПЛУК ЗАЛІЗА У ВХІДНОМУ ПЕРЕРІЗІ ЗАВАНТАЖЕННЯ ФІЛЬТРА

Запропоновано нелінійну кінетичну модель трансформації та іммобілізації двох форм заліза при фізико-хімічному знезалізненні підземних вод. Отримано її строгі та наближені розв'язки стосовно вхідного перерізу завантаження фільтра. Проаналізовано можливість використання різних способів спрощення математичної моделі із застосуванням динамічного осереднення.

Ключові слова: фізико-хімічне знезалізнення, фільтрування, математичне моделювання, автокаталітичність, динамічне осереднення.

Предложено нелинейную кинетическую модель трансформации и иммобилизации двух форм железа при физико-химическом обезжелезивании подземных вод. Получены ее строгие и приближенные решения применительно к входному сечению загрузки фильтра. Проанализирована возможность использования различных способов упрощения математической модели с использованием динамического осреднения.

Ключевые слова: физико-химическое обезжелезивание, фильтрация, математическое моделирование, автокаталитичность, динамическое осреднение.

A nonlinear kinetic model of transformation and immobilization of iron two forms was proposed for physicochemical groundwater deferrization. Exact and approximate solutions of the model were obtained in the input section of the filter medium. The possibility of using different methods to simplify the model by dynamic averaging was analyzed.

Key words: physicochemical deferrization, filtration, mathematical modelling, autocatalyticity, dynamic averaging.

Значна частина підземних вод в різних регіонах України має підвищену концентрацію сполук заліза, що негативно впливає на здоров'я населення [1,4;2,3]. Для вирішення цієї проблеми проведені великі обсяги експериментальних та теоретичних досліджень, розроблені різноманітні

технологічні схеми та відносно прості методи розрахунку [1,122-164;2,95-134;3,48;4,9-12;5,1468-1479]. Проте, не враховувався ряд важливих ефектів, серед яких потрібно виділити нелінійні ефекти масообміну, автокаталітичність процесу, особливості консолідації осаду тощо. Ключову роль в практиці знезалізнення води відіграють фізико-хімічні перетворення заліза [1,51;2,99;4,12;5,1471], оскільки вони безпосередньо відповідають за його видалення.

При виконанні теоретичного аналізу освітлення підземних вод з високим вмістом заліза в шарі завантаження особлива увага приділялась вивченню аналітичними та експериментальними методами динаміки забруднення його вхідного перерізу. По-перше, тут фільтрувальний матеріал забруднюється з найбільшою швидкістю та, як наслідок, різко знижується його пропускна спроможність. По-друге, вдається вивести залежності, які строго описують іммобілізацію двох форм заліза саме в даному перерізі. Останні можуть розглядатися при проведенні комплексних досліджень як еталонні і здатні принести користь завдяки тому, що:

- дозволяють оцінювати залежність специфічних (нелінійних) ефектів, що обумовлені автокаталітизмом закису заліза, обмеженістю брудомісткості завантаження, по відношенню до закису та гідроксиду заліза;
- визначати похибки, що вносяться в розрахункові залежності, внаслідок використання наближених прийомів та методів розв'язання прикладних задач;
- є надійною базою для обробки дослідних даних з метою отримання характерних значень модельних коефіцієнтів та апробації розрахункових формалізмів.

Для виділеного перерізу відповідна математична модель являє собою суттєво спрощену в математичному відношенні (але не в фізичному) версію загальної моделі фізико-хімічного знезалізнення зі спрощеною аерацією. В такому випадку предметом розрахунків служать тільки концентрації адсорбованого закису S_{a0} та сорбованого (в загальному розумінні) гідроксиду S_{h0} [6,178;7,114]. Основу моделі, що приймається для вхідного перерізу, складає наступна система нелінійних кінетичних рівнянь

$$\frac{\partial S_{a0}}{\partial t} = k_a \cdot f_a(S_{a0}) \cdot (S_{ma} - S_{a0}) \cdot C_{a0} - K_d S_{a0}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial S_{h0}}{\partial t} = k_h \cdot (S_{mh} - S_{h0}) \cdot C_{h0} + K_d S_{a0}, \quad (2)$$

до якої приєднуються початкові умови

$$t = 0, S_{a0} = S_{a0}^0, S_{h0} = S_{h0}^0. \quad (3)$$

Тут k_a , k_h – приведені коефіцієнти швидкостей адсорбції закису заліза та сорбції зваженого гідроксиду заліза; K_d – коефіцієнт швидкості окислення

адсорбованого закису; S_{ma} , S_{mh} – брудомісткості по відношенню до закису та гідроксиду заліза; S_{a0} , S_{h0} – постійні концентрації закису та гідроксиду заліза у вхідній воді; $f_a(S_{a0})$ – автокаталітична функція.

Для узагальнення результатів розв'язку задачі (1) – (3) вводяться безрозмірні змінні та коефіцієнти: $\bar{S}_{a0} = \frac{S_{a0}}{S_{mh}}$, $\bar{S}_{h0} = \frac{S_{h0}}{S_{mh}}$, $\bar{t} = \frac{V \cdot t}{n_0 \cdot L}$,
 $\bar{k}_a = \frac{n_0 \cdot L \cdot C_0}{V} \cdot k_a$, $\bar{k}_h = \frac{n_0 \cdot L \cdot C_0}{V} \cdot k_h$, $\bar{K}_d = \frac{n_0 \cdot L}{V} \cdot K_d$, $\bar{S}_{ma} = \frac{S_{ma}}{S_{mh}}$, $\bar{C}_{a0} = \frac{C_{a0}}{C_0}$,
 $\bar{C}_{h0} = \frac{C_{h0}}{C_0}$, $C_0 = C_{a0} + C_{h0}$, $\bar{S}_{a0}^0 = \frac{S_{a0}^0}{S_{mh}}$, $\bar{S}_{h0}^0 = \frac{S_{h0}^0}{S_{mh}}$, n_0 – поруватість чистого завантаження; L – висота завантаження; V – швидкість фільтрування. Тоді, початкова задача набуває такой остаточної вигляд

$$\frac{\partial \bar{S}_{a0}}{\partial \bar{t}} = \bar{k}_a \cdot \bar{f}_a(\bar{S}_{a0}) \cdot (\bar{S}_{ma} - \bar{S}_{a0}) \cdot \bar{C}_{a0} - \bar{K}_d \cdot \bar{S}_{a0}, \quad (4)$$

$$\frac{\partial \bar{S}_{h0}}{\partial \bar{t}} = \bar{k}_h \cdot \bar{C}_{h0} \cdot (1 - \bar{S}_{h0}) + \bar{K}_d \cdot \bar{S}_{a0}, \quad (5)$$

$$\bar{t} = 0, \quad \bar{S}_{a0} = \bar{S}_{a0}^0, \quad \bar{S}_{h0} = \bar{S}_{h0}^0. \quad (6)$$

Рівняння (4) не залежить від рівняння (5) та відноситься до звичайних диференціальних рівнянь зі змінними, що розділяються. Його точний розв'язок виражається наступною оберненою інтегральною функцією

$$\bar{t} = Y(\bar{S}_{a0}) = \int_{\bar{S}_{a0}^0}^{\bar{S}_{a0}} \frac{d\xi}{\bar{k}_a \cdot \bar{C}_{a0} \cdot f_a(\xi) \cdot (\bar{S}_{ma} - \xi) - \bar{K}_d \cdot \xi}, \quad (7)$$

Рівняння (5) є лінійним з відомим згідно (7) вільним членом. Його строгий розв'язок має такой параметричний вид

$$\bar{S}_{h0}(\bar{t}, \bar{S}_{a0}) = 1 - e^{-\bar{k}_h \cdot \bar{C}_{h0} \cdot \bar{t}} \left[1 - \bar{S}_{h0}^0 - \bar{K}_d \int_{\bar{S}_{a0}^0}^{\bar{S}_{a0}} \frac{\eta \cdot e^{\bar{k}_h \cdot \bar{C}_{h0} \cdot Y(\eta)}}{\bar{k}_a \cdot \bar{C}_{a0} \cdot f_a(\eta) \cdot (\bar{S}_{ma} - \eta) - \bar{K}_d \cdot \eta} d\eta \right]. \quad (8)$$

Тут $Y(\eta)$ представляється у відповідності з (7). Для виконання конкретних розрахунків спочатку потрібно задати функцію $f_a(\bar{S}_{a0})$, потім вибрати розрахункове значення \bar{S}_{a0} та послідовно вирахувати з (7) час \bar{t} , який відповідає йому, з (8) при вже відомих \bar{t} та \bar{S}_{a0} значення \bar{S}_{h0} . До речі, з (4) – (7) випливає, що при необмеженому в часі протіканні освітлювального процесу ($\bar{t} \rightarrow \infty$) шукані функції повинні досягати граничних значень $\bar{S}_{a0\infty}$ та $\bar{S}_{h0\infty}$, перше з яких знаходиться підбором з рівняння

$$\bar{k}_a \cdot \bar{C}_{a0} \cdot \bar{f}_a(\bar{S}_{a0\infty}) \cdot (\bar{S}_{ma} - \bar{S}_{a0\infty}) + \bar{K}_d \cdot \bar{S}_{a0\infty} = 0,$$

а друге – за формулою

$$\bar{S}_{h0\infty} = 1 + \frac{\bar{K}_d \cdot \bar{S}_{a0\infty}}{\bar{k}_h \cdot \bar{C}_{h0}}.$$

Нижче, розглядаються деякі часткові випадки переставлень (7) та (8). Отже, у випадку відсутності автокаталітичного ефекту ($\bar{f}_a = 1$) з (7), (8) випливає

$$\bar{S}_{a0}(\bar{t}) = \frac{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{S}_{ma}}{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d} + \left(\bar{S}_{a0}^0 - \frac{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{S}_{ma}}{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d} \right) e^{-(\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d) \bar{t}}, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \bar{S}_{h0}(\bar{t}) = & 1 + \frac{\bar{k}_a \bar{K}_d \bar{C}_{a0} \bar{S}_{ma}}{\bar{k}_h \bar{C}_{h0} (\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d)} + \frac{\bar{K}_d \bar{S}_{ma}}{\bar{k}_h \bar{C}_{h0} - \bar{k}_a \bar{C}_{a0} - \bar{K}_d} \left(\bar{S}_{a0}^0 - \frac{\bar{k}_a \bar{C}_{a0}}{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d} \right) e^{-(\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d) \bar{t}} + \\ & + \left[\bar{S}_{h0}^0 - 1 - \frac{\bar{k}_a \bar{K}_d \bar{C}_{a0} \bar{S}_{ma}}{\bar{k}_h \bar{C}_{h0} (\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d)} - \frac{\bar{K}_d \bar{S}_{ma}}{\bar{k}_h \bar{C}_{h0} - \bar{k}_a \bar{C}_{a0} - \bar{K}_d} \left(\bar{S}_{a0}^0 - \frac{\bar{k}_a \bar{C}_{a0}}{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d} \right) \right] e^{-\bar{k}_h \bar{C}_{h0} \bar{t}}. \end{aligned} \quad (10)$$

Відповідно до (9), (10), середні за період $[0, T]$ значення \bar{S}_{a0c} , \bar{S}_{h0c} будуть

$$\bar{S}_{a0c}(T) = \frac{1}{T} \int_0^T \bar{S}_{a0}(\bar{t}) d\bar{t} = \frac{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{S}_{ma}}{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d} + \left(\bar{S}_{a0}^0 - \frac{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{S}_{ma}}{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d} \right) \frac{1 - e^{-(\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d) T}}{T(\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d)}, \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \bar{S}_{h0c}(T) = & \frac{1}{T} \int_0^T \bar{S}_{h0}(\bar{t}) d\bar{t} = 1 + \frac{\bar{k}_a \bar{K}_d \bar{C}_{a0} \bar{S}_{ma}}{\bar{k}_h \bar{C}_{h0} (\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d)} + \frac{\bar{K}_d \bar{S}_{ma}}{\bar{k}_h \bar{C}_{h0} - \bar{k}_a \bar{C}_{a0} - \bar{K}_d} \left(\bar{S}_{a0}^0 - \frac{\bar{k}_a \bar{C}_{a0}}{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d} \right) \frac{1 - e^{-(\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d) T}}{T(\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d)} + \\ & + \left[\bar{S}_{h0}^0 - 1 - \frac{\bar{k}_a \bar{K}_d \bar{C}_{a0} \bar{S}_{ma}}{\bar{k}_h \bar{C}_{h0} (\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d)} - \frac{\bar{K}_d \bar{S}_{ma}}{\bar{k}_h \bar{C}_{h0} - \bar{k}_a \bar{C}_{a0} - \bar{K}_d} \left(\bar{S}_{a0}^0 - \frac{\bar{k}_a \bar{C}_{a0}}{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d} \right) \right] \frac{1 - e^{-\bar{k}_h \bar{C}_{h0} T}}{T \bar{k}_h \bar{C}_{h0}}. \end{aligned} \quad (12)$$

Якщо, крім того, знехтувати і окисненням адсорбованого закису заліза ($\bar{K}_d = 0$), то з (9) та (10) випливають прості залежності

$$\bar{S}_{a0}(\bar{t}) = \bar{S}_{ma} + (\bar{S}_{a0}^0 - \bar{S}_{ma}) e^{-\bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{t}}, \quad (13)$$

$$\bar{S}_{h0}(\bar{t}) = 1 + [\bar{S}_{h0}^0 - 1] e^{-\bar{k}_h \bar{C}_{h0} \bar{t}}. \quad (14)$$

Нехай автокаталітичний ефект характеризується лінійною автокаталітичною функцією

$$f_a(\bar{S}_{a0}) = 1 + \theta \cdot \bar{S}_{a0}. \quad (15)$$

Тоді

$$Y(\bar{S}_{a0}) = \int_{\bar{S}_{a0}}^{\bar{S}_{a0}^0} \frac{d\xi}{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} \theta \xi^2 + (\bar{k}_a \bar{C}_{a0} - \bar{k}_a \bar{C}_{a0} \theta \bar{S}_{ma} + \bar{K}_d) \xi - \bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{S}_{ma}}. \quad (16)$$

Оскільки $\Delta_\theta = (\bar{k}_a \bar{C}_{a0} - \bar{k}_a \bar{C}_{a0} \theta \bar{S}_{ma} + \bar{K}_d)^2 + 4 \bar{k}_a^2 \bar{C}_{a0}^2 \theta \bar{S}_{ma} > 0$, то інтеграл (16) виражається через елементарні функції наступним чином

$$Y(\bar{S}_{a0}) = \frac{2}{\sqrt{\Delta_\theta}} \ln \left[\frac{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} (2\theta \bar{S}_{a0}^0 + 1 - \theta \bar{S}_{ma}) + \bar{K}_d - \sqrt{\Delta_\theta}}{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} (2\theta \bar{S}_{a0}^0 + 1 - \theta \bar{S}_{ma}) + \bar{K}_d + \sqrt{\Delta_\theta}} \cdot \frac{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} (2\theta \bar{S}_{a0}^0 + 1 - \theta \bar{S}_{ma}) + \bar{K}_d + \sqrt{\Delta_\theta}}{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} (2\theta \bar{S}_{a0}^0 + 1 - \theta \bar{S}_{ma}) + \bar{K}_d - \sqrt{\Delta_\theta}} \right]. \quad (17)$$

Традиційно, складні математичні моделі комплексних технологічних процесів прийнято спрощувати шляхом осереднення їх, як окремих, так і груп членів. Особливо дієвою являється лінеаризація, як різновид універсального прийому осереднення, завдяки якій вдається усунути нелінійність моделі і тим

самим з'являється можливість розв'язати її аналітичним методом. Разом з тим, заміна змінних лінійних членів на їх середні величини може сприяти виведенню простих розрахункових формалізмів.

Отриманий вище строгий розв'язок локальної задачі знезалізнення може слугувати еталоном при оцінці різних способів осереднення кінетичних рівнянь для закису (1) та оксиду (2) заліза. Подібний порівняльний аналіз підказує найкращий шлях до аналітичного розв'язку загальної задачі фізико-хімічного знезалізнення та її складових – задач видалення закису та гідроксиду заліза.

В першу чергу, оцінюється ефективність почергового та спільного осереднення обох членів в правій частині лінійного аналога рівняння (4) ($\bar{f}_a = 1$). Перший спосіб осереднення полягав в наступному спрощенні (лінеаризації) першого члена – формально приймається $\bar{S}_{ma} - \bar{S}_{a0} = \bar{S}_{ma} - \bar{S}_{a0c}$, де

$$\bar{S}_{a0c}(T) = \frac{1}{T} \int_0^T \bar{S}_{a0}(\bar{t}) d\bar{t}, \quad (18)$$

T – тривалість розрахункового періоду.

Отже, відповідне кінетичне рівняння буде

$$\frac{d\bar{S}_{a0}}{d\bar{t}} + \bar{K}_d \bar{S}_{a0} = \bar{k}_a \bar{C}_{a0} [\bar{S}_{ma} - \bar{S}_{a0c}(T)]. \quad (19)$$

Розв'язок (19) при умові (3) знайдений в параметричній формі

$$\bar{S}_{a0}(\bar{t}, T) = \bar{S}_{a0}^0 e^{-\bar{K}_d \bar{t}} + \frac{\bar{k}_a \bar{C}_{a0}}{\bar{K}_d} [\bar{S}_{ma} - \bar{S}_{a0c}(T)] (1 - e^{-\bar{K}_d \bar{t}}), \quad (20)$$

де
$$\bar{S}_{a0c}(T) = \frac{\bar{K}_d \bar{S}_{a0}^0 (1 - e^{-\bar{K}_d T}) + \bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{S}_{ma} (\bar{K}_d T - 1 + e^{-\bar{K}_d T})}{T \bar{K}_d^2 + \bar{k}_a \bar{C}_{a0} (\bar{K}_d T - 1 + e^{-\bar{K}_d T})};$$

при виконанні конкретних розрахунків T ототожнюється з \bar{t} .

Далі осереднюється другий член з правої частини (4), так що

$$\frac{d\bar{S}_{a0}}{d\bar{t}} + \bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{S}_{a0} = \bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{S}_{ma} + \bar{K}_d \bar{S}_{a0c}(T). \quad (21)$$

Параметричний розв'язок (21) представляється залежністю

$$\bar{S}_{a0}(\bar{t}, T) = \bar{S}_{a0}^0 e^{-\bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{t}} + \left[\bar{S}_{ma} - \frac{\bar{K}_d}{\bar{k}_a \bar{C}_{a0}} \bar{S}_{a0c}(T) \right] (1 - e^{-\bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{t}}), \quad (22)$$

де
$$\bar{S}_{a0c}(T) = \bar{k}_a \bar{C}_{a0} \frac{\bar{S}_{a0}^0 (1 - e^{-\bar{k}_a \bar{C}_{a0} T}) + \bar{S}_{ma} (T \bar{k}_a \bar{C}_{a0} - 1 + e^{-\bar{k}_a \bar{C}_{a0} T})}{T \bar{k}_a^2 \bar{C}_{a0}^2 + \bar{K}_d (T \bar{k}_a \bar{C}_{a0} - 1 + e^{-\bar{k}_a \bar{C}_{a0} T})}.$$

Нарешті, при осередненні двох відмічених членів кінетичне рівняння буде

$$\frac{d\bar{S}_{a0}}{d\bar{t}} = \bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{S}_{ma} - (\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d) \bar{S}_{a0c}(T), \quad (23)$$

а його розв'язок виражається системою рівнянь

$$\bar{S}_{a0}(\bar{t}, T) = \bar{S}_{a0}^0 + [\bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{S}_{ma} - (\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d) \bar{S}_{a0c}(T)] \bar{t}, \quad (24)$$

$$\bar{S}_{a0c}(T) = \frac{2\bar{S}_{a0}^0 + \bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{S}_{ma} T}{2 + T(\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d)}.$$

Точний та наближений розв'язки ілюструються результатами розрахунку прикладу з наступними характерними початковими даними: $\bar{k}_a = 0.015$, $\bar{k}_h = 0.0005$, $\bar{K}_d = 0.0015$, $\bar{S}_{ma} = 1$, $\bar{C}_{a0} = \bar{C}_{h0} = 0.5$, $\bar{S}_{a0}^0 = 0$. Графіки зростання з часом відносних концентрацій адсорбованого закису заліза на вхіді в завантаження зображено на рис. 1.

Еталонною являється крива (4). Близько до неї розташовується крива 3, яка розрахована при осередненій швидкості окислення адсорбованого двовалентного заліза. Також визначалася \bar{S}_{a0} , при максимальній швидкості окислення $\bar{K}_d \bar{S}_{ma}$ (крива 5). Осереднення члена, яких характеризує адсорбційний процес, призводить до мінімальних помилок в початковий період, але потім вони швидко зростають. Таким чином, лінеаризація вихідного кінетичного рівняння при спрацюванні більшої частини адсорбційної ємності може призводити до серйозних помилок.

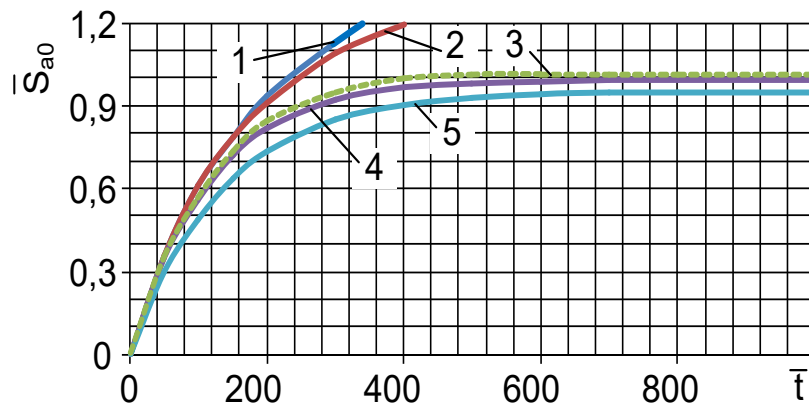


Рис. 1. Зростання відносної концентрації адсорбованого закису заліза у вхідному перерізі: **1, 3, 5** – наближені розрахунки за формулами (20), (22), (24); **4** – точний розрахунок за формулою (7)

Аналогічним чином і також при $\bar{f}_a = 1$ спрощувалось рівняння кінетики гідроксиду заліза (5). Після часткового осереднення першого члена в правій частині воно прийняло наступний вигляд

$$\frac{\partial \bar{S}_{h0}}{\partial \bar{t}} = \bar{k}_h \bar{C}_{h0} (1 - \bar{S}_{h0c}(T)) + \bar{K}_d \cdot \bar{S}_{a0}(\bar{t}). \quad (25)$$

Параметричний розв'язок (5), (6), якщо для $\bar{S}_{a0}(\bar{t})$ використовувати точний вираз (9), буде

$$\bar{S}_{h0}(\bar{t}, T) = \bar{S}_{h0}^0 + \bar{k}_h \bar{C}_{h0} [1 - \bar{S}_{h0c}(T)] \bar{t} + \frac{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{K}_d \bar{S}_{ma} \bar{t}}{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d} + \frac{\bar{K}_d}{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d} \left(\bar{S}_{a0}^0 - \frac{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{S}_{ma}}{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d} \right) \left(1 - e^{-(\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d) \bar{t}} \right), \quad (26)$$

$$\text{де } \bar{S}_{h0c}(T) = \frac{I}{2 + \bar{k}_h \bar{C}_{h0} T} \left\{ 2\bar{S}_{h0}^0 + \left(\bar{k}_h \bar{C}_{h0} + \frac{\bar{k}_a \bar{K}_d \bar{C}_{a0}}{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d} \right) T + \frac{2\bar{K}_d}{T(\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d)^2} \left(\bar{S}_{a0}^0 - \frac{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} \bar{S}_{ma}}{\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d} \right) \right\} \cdot \left[(\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d) T - I + e^{-(\bar{k}_a \bar{C}_{a0} + \bar{K}_d) T} \right].$$

Нехай тепер постійним впродовж розрахункового періоду буде другий член правої частини рівняння (5), так що

$$\frac{\partial \bar{S}_{h0}}{\partial \bar{t}} + \bar{k}_h \bar{C}_{h0} \bar{S}_{h0} = \bar{k}_h \bar{C}_{h0} + \bar{K}_d \cdot \bar{S}_{a0c}(T). \quad (27)$$

Звідси легко отримати

$$\bar{S}_{h0}(\bar{t}, T) = \bar{S}_{h0}^0 e^{-\bar{k}_h \bar{C}_{h0} \bar{t}} + \left[I - \frac{\bar{K}_d \bar{S}_{a0c}(T)}{\bar{k}_h \bar{C}_{h0}} \right] \left(I - e^{-\bar{k}_h \bar{C}_{h0} \bar{t}} \right), \quad (28)$$

де $\bar{S}_{a0c}(T)$ виражається з допомогою (11).

Нарешті, в результаті спрощення двох членів отримані кінетичні рівняння

$$\frac{\partial \bar{S}_{h0}}{\partial \bar{t}} = \bar{k}_h \bar{C}_{h0} [I - \bar{S}_{h0c}(T)] + \bar{K}_d \cdot \bar{S}_{a0c}(T) \quad (29)$$

$$\text{та його розв'язок } \bar{S}_{h0}(\bar{t}, T) = \bar{S}_{h0}^0 + \left[\bar{k}_h \bar{C}_{h0} - \bar{k}_h \bar{C}_{h0} \bar{S}_{h0c}(T) + \bar{K}_d \bar{S}_{a0c}(T) \right] \bar{t}, \quad (30)$$

$$\text{де } \bar{S}_{h0c}(T) = \frac{2\bar{S}_{h0}^0 + \left[\bar{k}_h \bar{C}_{h0} + \bar{K}_d \bar{S}_{a0c}(T) \right] T}{2 + \bar{k}_h \bar{C}_{h0} T}.$$

Автокаталітичний ефект при моделюванні фізико-хімічного знезалізнення враховувався шляхом автокаталітичної функції $f_a(S_a)$, яка була введена в рівняння кінетики закису заліза. Її вплив розповсюджувався і на адсорбційний, і на сорбційний процеси, помітно підсилюючи їх і, як наслідок, прискорюючи накопичення осаду. Значущість ефекту для видалення заліза нескладно оцінювати на основі залежностей (7) та (8). В якості його міри виправдано використовувати наступні функціональні автокаталітичні коефіцієнти

$$A_{a0}(\bar{t}, \theta) = \frac{\bar{S}_{a0}(\bar{t}, \theta)}{\bar{S}_{a0}(\bar{t}, \theta \rightarrow 0)}, \quad A_{h0}(\bar{t}, \theta) = \frac{\bar{S}_{h0}(\bar{t}, \theta)}{\bar{S}_{h0}(\bar{t}, \theta \rightarrow 0)}. \quad (31)$$

Вони характеризують відносний приріст адсорбованого закису та осадженого гідроксиду заліза за рахунок тільки вказаного ефекту.

На рис. 2 показано сімейство кривих $A_{a0}(\bar{t})$, при різних значеннях θ і таких початкових даних: $\bar{k}_a = 0.015$, $\bar{K}_d = 0.0015$, $\bar{S}_{ma} = 1$, $\bar{C}_{a0} = 0.5$. Масштабом для шуканої \bar{S}_{a0} слугував ємнісний параметр \bar{S}_{ma} . Максимальне значення A_{a0} досягалося при $\bar{t} \approx 150$, $\theta = 1$ та складало 1,21.

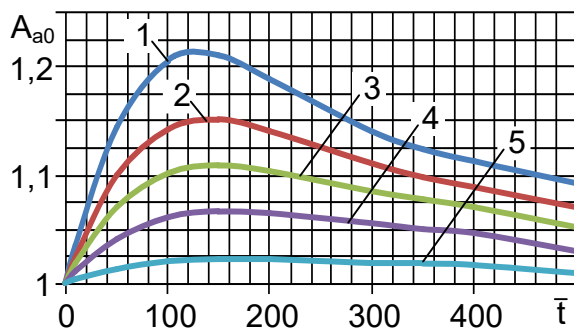


Рис. 2. Залежність $A_{a0}(\bar{t})$

1 – $\theta = 1$; 2 – $\theta = 0.7$; 3 – $\theta = 0.5$;
4 – $\theta = 0.3$; 5 – $\theta = 0.1$

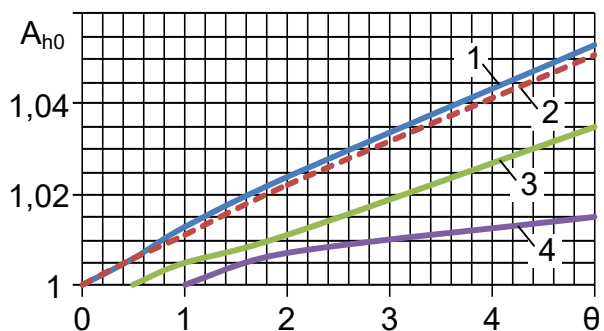


Рис. 3. Залежність $A_{h0}(\theta)$

1 – $\bar{t} = 2000$; 2 – $\bar{t} = 1000$;
3 – $\bar{t} = 500$; 4 – $\bar{t} = 300$

Результати моделювання дозволяють зробити висновок, що автокаталітичний ефект для адсорбційного заліза має скоріше поправочний характер, що дозволяє уникнути розв'язку суттєво ускладненої внаслідок врахування $f_a(S_a)$ вихідної моделі та обмежитися лише корекцією простішого розв'язку при $f_a = 1$.

Аналогічні розрахунки виконувалися і по відношенню до тривалентного заліза. Відносна концентрація \bar{S}_{h0} розраховувалася із залученням строгого та трьох наближених розв'язків (4) – (6). Результати розрахунків показали, що задіяні способи спрощення (осереднення) забезпечують при визначенні \bar{S}_{h0}^0 мінімальні похибки (менше 3,5%).

Автокаталітичний ефект на динаміці накопичення осаду позначається в меншій мірі, ніж на адсорбційному процесі. Особливо він проявляється при $\bar{t} < 500$, що відповідає реальній тривалості фільтрування підземних вод на установках фізико-хімічного знезалізнення. Результати моделювання показали, що ефект зі збільшенням θ підсилюється за лінійною залежністю (рис. 3).

Висновки

Отримано точні розв'язки математичної моделі динаміки накопичення забруднень у вхідному перерізі завантаження фільтрів при фізико-хімічному знезалізненні підземних вод, що враховує наявність двох форм заліза (закисного та гідроксиду заліза), нелінійні ефекти масообміну, обумовлені обмеженістю адсорбційного та сорбційного ресурсів, інтенсифікацію видалення заліза під впливом накопиченого в поровому просторі осаду та безвідривне фільтрування. Проведена оцінка можливості використання різних способів динамічного осереднення для вирішення локальної і складніших задач освітлення води фільтруванням.

Спираючись на результати досліджень та загальну математичну модель фізико-хімічного знезалізнення води, планується розробити метод

інженерного розрахунку характеристик фільтрування та технологічних параметрів з урахуванням поступового зменшення освітлювального потенціалу завантаження і консолідації осаду.

Список літератури

1. *Очищення природної води на пінополістирольних фільтрах: [монографія] / С.Ю. Мартинов, А.М.Орлова та ін.; за заг. редакцією В.О. Орлова. Рівне: НУВГП, 2012. 172 с.*
2. *Тугай А.М. Продуктивність водозабірних свердловин в умовах кольматажу: [монографія] / А.М. Тугай, О.Я. Олійник, Я.А. Тугай. Харків: ХНАМГ, 2004. 240 с.*
3. *Gruett G. Removing Problem Iron / G. Gruett // Water Technology. 1993. V. 16(3). P. 48-51.*
4. *Sharma S.K. Adsorptive Iron Removal from Groundwater: Dissertation for Degree of Doctor / S.K. Sharma. Delft, The Netherlands, 2009. 202 p.*
5. *Water Treatment Handbook, 7th Edition. 2 Volume Set. Hardcover : Publisher: Lavoisier, 2007. 1904 p.*
6. *Поляков В.Л. До теорії фізико-хімічного знезалізнення підземних води та її інформаційного забезпечення / В.Л. Поляков, С.Ю. Мартинов // Матеріали V Міжнародної науково-практичної конференції «Чиста вода. Фундаментальні, прикладні та промислові аспекти». К.: Видавничий дім «КИЙ», 26-27 жовтня 2017 р. С. 178–181.*
7. *Поляков В.Л. О математическом моделировании физико-химического обезжелезивания подземных вод с учетом нелинейных эффектов / В.Л. Поляков, С.Ю. Мартынов // Тези за матеріалами VIII Міжнародної наукової конференції «Ресурс і безпека експлуатації конструкцій, будівель та споруд». Х.: ХНУБА, 18-19 жовтня 2017 р. С. 113–115.*

Стаття надійшла до редакції 24.11.17